

| | |
|-------------|---|
| Title | 洗濯板ポテンシャル影響下での有限領域に於ける拡散過程(講義ノート) |
| Author(s) | 田代, 徹; 森田, 昭雄 |
| Citation | 物性研究 (2010), 94(5): 649-673 |
| Issue Date | 2010-08-05 |
| URL | http://hdl.handle.net/2433/169348 |
| Right | |
| Type | Departmental Bulletin Paper |
| Textversion | publisher |

洗濯板ポテンシャル影響下での有限領域に於ける拡散過程

お茶の水女子大学 理学部 田代 徹*
 東京大学大学院 総合文化研究科 森田 昭雄

(2010 年 4 月 5 日受理)

目次

| | | |
|-------|--|-----|
| 1 | はじめに | 650 |
| 1.1 | 研究の背景 | 650 |
| 1.2 | 周期係数常微分方程式と特性指数 | 650 |
| 1.3 | 本論文の目的 | 651 |
| 1.4 | 本論文の構成と概要 | 652 |
| 2 | 洗濯板ポテンシャル影響下での有限領域に於ける拡散過程 | 652 |
| 2.1 | 拡散方程式 | 652 |
| 2.2 | 境界条件 | 655 |
| 2.3 | 境界条件と特性指数 | 657 |
| 2.3.1 | $\nu' = 0, 0 < \nu'' < 1$ | 658 |
| 2.3.2 | $\nu' = 0, \nu'' = 0 \text{ or } 1$ | 659 |
| 2.3.3 | $\nu' \neq 0, \nu'' = 0 \text{ or } 1$ | 660 |
| 2.4 | $\rho(x, t)$ の挙動 | 661 |
| 2.4.1 | $F = 0$ | 661 |
| 2.4.2 | $F \neq 0$ | 664 |
| 2.5 | k_n の漸近的表現 | 666 |
| 2.6 | Kramers の理論との比較 | 667 |
| 3 | まとめ | 670 |

*E-mail:tashiro@cosmos.phys.ocha.ac.jp

1 はじめに

1.1 研究の背景

周期ポテンシャルに一定の外力が加わったものを，その形状から”洗濯板ポテンシャル”と呼ぶことがある．具体的に式を使って表すと以下ようになる．

$$V(x) = Fx + U(x) \quad (U(x): \text{周期}\pi\text{の周期関数}) \quad (1.1.1)$$

この洗濯板ポテンシャル上のブラウン運動が繰り広げる拡散的なダイナミクスは，物理の幅広い分野で見受けられる．例を挙げると，摩擦とノイズの影響を受けた振り子 [1,20]，超イオン導電体 [2-4]，ノイズ電流を考慮した Josephson 接合 [5-10]，リング・レーザージャイロ内の量子ノイズ [11-14]，ニューロン活動 [15,16] などである．これら物理現象のダイナミクスは一般には Fokker-Planck 方程式，overdamped limit，すなわち摩擦抵抗が十分大きい極限では Smoluchowski 方程式によってモデル化され，数多くの理論的な研究が昔から成されてきている．特に Smoluchowski 方程式に関しては古くは 1958 年に Stratonovich が定常解を導出し [17]，平均速度や有効拡散係数の近似的な表現の導出方法が提案された[†]．そして 1980 年台までには Risken らによって，Smoluchowski 方程式の時間依存する解が導出された [1,18-20]．ただし境界条件は，振り子の問題，もしくは境界から十分離れたバルクの挙動を対象にしているのので，周期性境界条件を課している．

1.2 周期係数常微分方程式と特性指数

洗濯板ポテンシャルは陽に時間に依らないので，Smoluchowski 方程式の解は空間と時間に分離することが出来る．その結果，詳しい議論は次節以降になされるが，空間部分は 1 階微分の係数が周期関数である線形な 2 階の常微分方程式となる．

周期係数常微分方程式として有名なものにパラメトリック振動子がある．これは以下の様に 0 階微分の係数が周期関数であるような線形微分方程式である：

$$\frac{d^2 z(t)}{dt^2} + \phi(t)z(t) = 0 \quad (\phi(t+\pi) = \phi(t)) . \quad (1.2.1)$$

この方程式を次のように表そう．

$$\frac{d}{dt}Z(t) = \Phi(t)Z(t) \quad (1.2.2)$$

ここで

$$Z(t) = \begin{pmatrix} z(t) \\ \dot{z}(t) \end{pmatrix}, \quad \Phi(t) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\phi(t) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.3)$$

とした．後で似た議論がされるが，この解は

$$Z(t) = G_p(t, t_0)Z(t_0) \quad (1.2.4)$$

[†]この手法は弱く傾いた洗濯板ポテンシャルやノイズの効果が小さいときに有効である．

となる。ここで

$$G_p(t, t_0) \equiv E_1 + \int_{t_0}^t dt_1 \Phi(t_1) + \int_{t_0}^t dt_1 \Phi(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \Phi(t_2) + \cdots \quad (E_1 : 2 \text{ 次の単位行列}) \quad (1.2.5)$$

である。(これも後で似た議論がされるが) ところで係数行列 $\Phi(t)$ の周期性によって

$$G_p(N\pi, 0) = G_p(\pi, 0)^N \quad (N = 1, 2, \cdots) \quad (1.2.6)$$

が満たされる。従って t が大きい極限 ($N \rightarrow \infty$) での解の安定性は $G_p(\pi, 0)$ の固有値 η によって決定されることがわかる。この η は次の特性方程式を満たす。

$$\eta^2 - \text{tr}[G_p(\pi, 0)]\eta + 1 = 0 \quad (1.2.7)$$

パラメトリック振動子の安定性の議論では、よく特性方程式の解を

$$e^{\pm \pi \nu} \quad (1.2.8)$$

で表す。この ν は特性指数と呼ばれ、一般には複素数である。特性指数を使えば解の安定性は整然と議論でき、また解も

$$e^{\pm \nu t} \times \text{periodic function} \quad (1.2.9)$$

として表現できる[‡]。

以上の議論はパラメトリック振動子についてであるが、本論文で扱う洗濯板ポテンシャル影響下の拡散方程式でも、その空間部分の解を議論する際に特性方程式が有効であることは間違いない。

1.3 本論文の目的

この様に周期係数常微分方程式の議論で威力を発揮する特性指数ではあるが、洗濯板ポテンシャル影響下の拡散方程式を扱う際に、今まではあまり日の目を見ることは無かった。それは当然のことで、研究の背景で言及した通り、これまでの研究は周期解を前提としているので、特性指数は限定されたものとなる。つまり特性指数を陽に考慮する意義は無いと言ってよい。

我々はこう言った現状を踏まえて、以下の2つの新たな観点から、特に摩擦抵抗が大きい極限における洗濯板ポテンシャル影響下の拡散現象に切り込んでいく。

- システムサイズの有限性が無視できない場合を扱えるようにするために、境界条件を周期性境界条件以外のもの考える。
- 境界条件を定める際に、特性指数を中心に据えて議論する。

実際に結果として、境界条件を満足するパラメータのとり得る範囲が限定されたものとなり、ちょうど固体物理で言うところのバンド構造のようになる事実が、特性指数を使うことで明瞭に理解できた。

[‡]この様な解の存在を保証するのが Floquet の定理 (固体物理学では Bloch の定理) である。

1.4 本論文の構成と概要

次節から議論を行う．先ず 2.1 で Smoluchowski 方程式と洗濯板ポテンシャルを提示し，変数分離をして空間部分を Strum-Liouville 型の微分方程式にする．この方程式の 1 階微分の係数は周期関数となっているので，パラメトリック振動子の議論を応用し，2.2 で境界条件によって特性指数が決定されることを示唆する．さらに 2.3 で具体的に特性指数が満たす条件を求める．2.4 から具体的に $U(x) = q \cos 2x$ として Smoluchowski 方程式の時間依存解の計算に入る．その際 2.3 での結果を使うことで，境界条件を満たす有限個の (Strum-Liouville 問題の) 固有関数によって解が再現できることが予想されるが，実際に数値的にその予想が正しいことがわかる．2.5 では変数分離定数 (Strum-Liouville 問題の固有値) の漸近解を解析的に求め，その結果から求められる，系が平衡に達する目安の時間 (緩和時間) と，Kramers の理論から導出される緩和時間とを 2.6 で比較し，両者が完全に一致することを明らかにする．

2 洗濯板ポテンシャル影響下での有限領域に於ける拡散過程

2.1 拡散方程式

洗濯板ポテンシャル影響下にある Smolchowski 方程式は以下のようにになる．

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} + V'(x) \right] \rho(x, t) \quad (2.1.1)$$

ここで $\rho(x, t)$ は確率密度関数を表す．また $V(x)$ が洗濯板ポテンシャルであり，周期が π の関数 $U(x)$ によって $V(x) = Fx + U(x)$ と表される．例として $U(x) = \cos 2x$ とした場合，Figure 2.1.1 のようになる．この形状が洗濯板ポテンシャルの名前の由来である．この場合 $F \geq 2$ で極小値がなくなる．

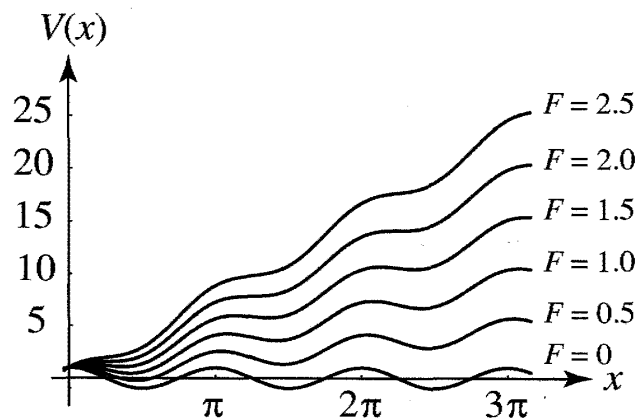


Figure 2.1.1: 洗濯板ポテンシャル $V(x) = Fx + \cos 2x$.

空間領域は有限区間とするが，特に $U(x)$ の周期の整数倍，即ち

$$0 \leq x \leq N\pi \quad (N = 1, 2, \dots)$$

とする．両端での境界条件については後述する．また初期条件は

$$\rho(x, 0) = \delta(x - x_0) \quad (2.1.2)$$

とする．

$V(x)$ は時間に陽に依存しないので， $\rho(x, t)$ を変数分離

$$\rho(x, t) = T(t)S(x) \quad (2.1.3)$$

して (2.1.1) 式に代入すると，

$$\frac{dT(t)}{dt} = -kT(t) \quad (2.1.4)$$

$$\frac{d^2 S(x)}{dx^2} + V'(x) \frac{dS(x)}{dx} + \{k + V''(x)\} S(x) = 0 \quad (2.1.5)$$

となる．ここで変数分離定数を k とした．(2.1.4) 式の解は明らかに

$$T(t) = T(0)e^{-kt} \quad (2.1.6)$$

である．更に (2.1.5) 式を Sturm-Liouville 型にするために

$$S(x) = W(x)\psi(x) \quad (2.1.7)$$

とする．ここで $W(x)$ は両端に反射壁があるときの平衡解に相当する：

$$W(x) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \rho(x, t) = \frac{e^{-V(x)}}{\int_0^{N\pi} dx e^{-V(x)}} . \quad (2.1.8)$$

この変換のもと，(2.1.5) 式は以下ようになる．

$$\frac{d}{dx} \left[W(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right] + kW(x)\psi(x) = 0 \quad (2.1.9)$$

更に (2.1.9) 式は次のように書き換えることが出来る．

$$\frac{d}{dx} \Psi(x) = K(x)\Psi(x) \quad (2.1.10)$$

ここで

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}, \quad K(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k & V'(x) \end{pmatrix}. \quad (2.1.11)$$

$V'(x) = F + U'(x)$ に関して，周期関数の微分 $U'(x)$ も π の周期関数であるから， $V'(x)$ は周期関数である．つまり $K(x + \pi) = K(x)$ が成り立つ．

(2.1.10) 式は形式的に次のように解くことが出来る．

$$\Psi(x) = \Psi(0) + \int_0^x dx_1 K(x_1) \Psi(x_1) \quad (2.1.12)$$

右辺の $\Psi(x_1)$ に左辺を逐次代入していけば

$$\Psi(x) = G_d(x, 0) \Psi(0) \quad (2.1.13)$$

となる．ここで

$$\mathbf{G}_d(x, 0) = \mathbf{E}_1 + \int_0^x dz_1 \mathbf{K}(z_1) + \int_0^x dz_1 \mathbf{K}(z_1) \int_0^{z_1} dz_2 \mathbf{K}(z_2) + \cdots \quad (\mathbf{E}_1 : 2 \times 2 \text{ 単位行列}) \quad (2.1.14)$$

である．この \mathbf{G}_d は以下の性質を有する．

$\mathbf{G}_d(x_2, x_1)$ ($0 \leq x_1 \leq x_2 \leq N\pi$) の性質

性質 i) $\mathbf{G}_d(x_2 + \pi, x_1 + \pi) = \mathbf{G}_d(x_2, x_1)$

性質 ii) $\mathbf{G}_d(x_2, x') \mathbf{G}_d(x', x_1) = \mathbf{G}_d(x_2, x_1)$

性質 iii) $\mathbf{G}_d(x_1, x_1) = \mathbf{E}_1$

性質 iv) $\frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{G}_d(x_2, x_1) = \mathbf{K}(x_2) \mathbf{G}_d(x_2, x_1), \quad \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{G}_d(x_2, x_1) = -\mathbf{G}_d(x_2, x_1) \mathbf{K}(x_1)$

性質 v) $\det [\mathbf{G}_d(x_2, x_1)] = \exp \left\{ \int_{x_1}^{x_2} dx \operatorname{tr} [\mathbf{K}(x)] \right\} = \exp [V(x_2) - V(x_1)]$

i) 以外は一般の線形常微分方程式に対して成り立つ良く知られた性質なので，それらの証明は他の書物に譲り，ここでは i) のみを証明する．

証明

(2.1.14) 式より

$$\mathbf{G}_d(x_2 + \pi, x_1 + \pi) = \mathbf{E}_1 + \int_{x_1 + \pi}^{x_2 + \pi} dz_1 \mathbf{K}(z_1) + \int_{x_1 + \pi}^{x_2 + \pi} dz_1 \mathbf{K}(z_1) \int_{x_1 + \pi}^{z_1} dz_2 \mathbf{K}(z_2) + \cdots \quad (2.1.15)$$

z_1 に関する積分で， $z_1 \rightarrow z_1 + \pi$ とすれば，例えば右辺第 2 項，第 3 項などは

$$\text{2nd term on R.H.S} = \int_{x_1}^{x_2} dz_1 \mathbf{K}(z_1 + \pi) = \int_{x_1}^{x_2} dz_1 \mathbf{K}(z_1), \quad (2.1.16)$$

$$\text{3rd term on R.H.S} = \int_{x_1}^{x_2} dz_1 \mathbf{K}(z_1 + \pi) \int_{x_1 + \pi}^{z_1 + \pi} dz_2 \mathbf{K}(z_2) = \int_{x_1}^{x_2} dz_1 \mathbf{K}(z_1) \int_{x_1 + \pi}^{z_1 + \pi} dz_2 \mathbf{K}(z_2), \quad (2.1.17)$$

となり，以降の項でも同様に置換される．さらに z_i ($i \geq 2$) に関する積分でも， $z_i \rightarrow z_i + \pi$ と順に置換していけば

$$\mathbf{G}_d(x_2 + \pi, x_1 + \pi) = \mathbf{G}_d(x_2, x_1) \quad (2.1.18)$$

が得られる．

□

2.2 境界条件

境界条件は周期性境界条件も含めて以下の3つについて考えていく。

- boundary 1 : 両端が反射壁 (Neumann 型境界条件)
- boundary 2 : 両端が吸収壁 (Dirichlet 型境界条件)
- boundary 3 : 周期性境界条件

ここで反射壁とは流束 $J(x, t)$

$$J(x, t) \equiv - \left[\frac{\partial}{\partial x} + V'(x) \right] \rho(x, t) = T(t) W(x) \psi'(x) \quad (2.2.1)$$

が0となることを意味するので, ψ' で表すと

$$J(x, t)|_{x=0, N\pi} = 0 \iff \psi'(x)|_{x=0, N\pi} = 0 \quad (2.2.2)$$

である。また吸収壁とは, そこで確率密度関数が0となることを意味する。よって ψ で表すと

$$\rho(x, t)|_{x=0, N\pi} = 0 \iff \psi(x)|_{x=0, N\pi} = 0 \quad (2.2.3)$$

である。

周期性境界条件とは両端で ρ と J が等しくなることで

$$\rho(N\pi, t) = \rho(0, t) \iff \psi(N\pi) = e^{FN\pi} \psi(0) \quad (2.2.4)$$

$$J(N\pi, t) = J(0, t) \iff \psi'(N\pi) = e^{FN\pi} \psi'(0) \quad (2.2.5)$$

である。以上まとめると

$$\text{boundary 1 : } \psi'(x) = 0 \text{ at } x = 0 \text{ and } N\pi, \quad (2.2.6)$$

$$\text{boundary 2 : } \psi(x) = 0 \text{ at } x = 0 \text{ and } N\pi, \quad (2.2.7)$$

$$\text{boundary 3 : } \Psi(N\pi) = e^{FN\pi} \Psi(0) \text{ } (\psi(0) \neq 0 \text{ and } \psi'(0) \neq 0). \quad (2.2.8)$$

これらは \mathbf{G}_d を使って

$$\text{boundary 1 : } \begin{pmatrix} \psi(N\pi) \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{G}_d(N\pi, 0) \begin{pmatrix} \psi(0) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.9)$$

$$\text{boundary 2 : } \begin{pmatrix} 0 \\ \psi'(N\pi) \end{pmatrix} = \mathbf{G}_d(N\pi, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ \psi'(0) \end{pmatrix}, \quad (2.2.10)$$

$$\text{boundary 3 : } \mathbf{G}_d(N\pi, 0) = e^{FN\pi} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.2.11)$$

と表される。このように境界条件は $\mathbf{G}_d(N\pi, 0)$ によって決まるが, \mathbf{G}_d が満たす性質を使うことで, より踏み込んだ議論が出来る。先ず性質 ii) より

$$\mathbf{G}_d(N\pi, 0) = \prod_{l=1}^N \mathbf{G}_d(l\pi, (l-1)\pi) \quad (2.2.12)$$

となるが、更に性質 i) によって

$$\mathbf{G}_d(l\pi, (l-1)\pi) = \mathbf{G}_d(\pi, 0) \quad (l = 1, 2, \dots, N) \quad (2.2.13)$$

なので

$$\mathbf{G}_d(N\pi, 0) = \mathbf{G}_d(\pi, 0)^N \quad (2.2.14)$$

となる。つまり $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ のべき乗によって境界条件が決定される。

ところで行列のべき乗を考える場合、それを標準形にした方が都合が良い。標準形は行列の固有値によって決まるが、この場合固有値の満たす特性方程式は以下ようになる。

$$\lambda^2 - \text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)]\lambda + e^{F\pi} = 0 \quad (2.2.15)$$

この2つの解を

$$e^{F\pi/2} e^{\pm \pi \nu} \quad (2.2.16)$$

と於いても何ら一般性は失われない。ここで ν は特性指数で一般に複素数である：

$$\nu \equiv \nu' + i\nu'' . \quad (2.2.17)$$

前節で議論した通り、パラメトリック振動子ではこのように特性方程式の解を特性指数を使って表現することで、長時間極限での系の安定性を単純に扱うことが出来た。今の有限区間の拡散の問題でも特性指数を導入することで、標準形を整然と分類出来、延いては boundary 1, 2, 3 の境界条件に対する Strum-Liouville 問題の理解につながる事となる。

それでは実際に $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ の標準形を求めてみよう。まず (2.2.15) 式の解が複素数のとき。即ち $|\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)]| < 2e^{F\pi/2}$ であり、 λ の絶対値は $e^{F\pi/2}$ なので $\nu' = 0$ である。また ν'' の範囲は

$$0 < \nu'' < 1 \quad (2.2.18)$$

として十分である。このとき $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ は以下のように対角化できる。

$$\mathbf{L}^{-1} \mathbf{G}_d(\pi, 0) \mathbf{L} = e^{F\pi/2} \begin{pmatrix} e^{i\pi\nu''} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi\nu''} \end{pmatrix} . \quad (2.2.19)$$

さらに

$$\mathbf{B}_r \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \quad (2.2.20)$$

なる行列を使うことで、

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}\mathbf{B}_r)^{-1} \mathbf{G}_d(\pi, 0) \mathbf{L}\mathbf{B}_r &= e^{F\pi/2} \mathbf{B}_r^{-1} \begin{pmatrix} e^{i\pi\nu''} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi\nu''} \end{pmatrix} \mathbf{B}_r \\ &= e^{F\pi/2} \begin{pmatrix} \cos \pi\nu'' & -\sin \pi\nu'' \\ \sin \pi\nu'' & \cos \pi\nu'' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

と変形できる。

$|\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)]| = 2e^{F\pi/2}$ のときは λ は重解 $\pm e^{F\pi/2}$ をとるので $\nu' = 0$ であり ν'' は 0 もしくは 1 である (複合は, $\nu'' = 0$ のとき +, $\nu'' = 1$ のとき -). このとき $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ の標準形は以下のようになる.

$$\mathbf{L}^{-1}\mathbf{G}_d(\pi, 0)\mathbf{L} = \begin{pmatrix} e^{\pi(i\nu''+F/2)} & 0 \\ 0 & e^{\pi(i\nu''+F/2)} \end{pmatrix} \quad (2.2.22)$$

or

$$\mathbf{L}^{-1}\mathbf{G}_d(\pi, 0)\mathbf{L} = \begin{pmatrix} e^{\pi(i\nu''+F/2)} & 1 \\ 0 & e^{\pi(i\nu''+F/2)} \end{pmatrix}. \quad (2.2.23)$$

$|\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)]| > 2e^{F\pi/2}$ のとき, λ は実数なので, ν'' は 0 か 1 である. このとき $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ は対角化可能で

$$\mathbf{L}^{-1}\mathbf{G}_d(\pi, 0)\mathbf{L} = e^{\pi(i\nu''+F/2)} \begin{pmatrix} e^{\pi\nu'} & 0 \\ 0 & e^{-\pi\nu'} \end{pmatrix} \quad (2.2.24)$$

となるが,

$$\mathbf{B}_i \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.2.25)$$

によって

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}\mathbf{B}_i)^{-1}\mathbf{G}_d(\pi, 0)\mathbf{L}\mathbf{B}_i &= e^{\pi(i\nu''+F/2)} \mathbf{B}_i^{-1} \begin{pmatrix} e^{\pi\nu'} & 0 \\ 0 & e^{-\pi\nu'} \end{pmatrix} \mathbf{B}_i \\ &= e^{\pi(i\nu''+F/2)} \begin{pmatrix} \cosh \pi\nu' & \sinh \pi\nu' \\ \sinh \pi\nu' & \cosh \pi\nu' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.2.26)$$

となる. 以上の特性指数と \mathbf{G}_d の標準形との関係を Table 2.2.1 にまとめた. このように特性指数を使って標準形が表現できるので, 境界条件によって ν が決定されることが解る.

Table 2.2.1: 特性指数 $\nu(=\nu' + i\nu'')$ と $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ の標準形との関係

| 特性指数 | $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ の標準形 |
|--|---|
| $\nu' = 0, 0 < \nu'' < 1$ | $e^{F\pi/2} \begin{pmatrix} \cos \pi\nu'' & -\sin \pi\nu'' \\ \sin \pi\nu'' & \cos \pi\nu'' \end{pmatrix}$ |
| $\nu' = 0, \nu'' = 0 \text{ or } 1$ | $\begin{pmatrix} e^{\pi(i\nu''+F/2)} & 0 \\ 0 & e^{\pi(i\nu''+F/2)} \end{pmatrix} \text{ or } \begin{pmatrix} e^{\pi(i\nu''+F/2)} & 1 \\ 0 & e^{\pi(i\nu''+F/2)} \end{pmatrix}$ |
| $\nu' \neq 0, \nu'' = 0 \text{ or } 1$ | $e^{\pi(i\nu''+F/2)} \begin{pmatrix} \cosh \pi\nu' & \sinh \pi\nu' \\ \sinh \pi\nu' & \cosh \pi\nu' \end{pmatrix}$ |

2.3 境界条件と特性指数

以上のように標準形が求まったので, それぞれの場合に於いて $\mathbf{G}_d(\pi, 0)^N$ を求め, 境界条件を満たすための ν , $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ の条件を調べる.

2.3.1 $\nu' = 0, 0 < \nu'' < 1$

(2.2.21) 式より明らかに行列 \mathbf{LB}_r の成分は実数である．それをいま

$$\mathbf{LB}_r = \begin{pmatrix} \alpha_r & \beta_r \\ \gamma_r & \delta_r \end{pmatrix} \quad (2.3.1)$$

とすると,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_d(\pi, 0)^N &= e^{N\pi F/2} \mathbf{LB}_r \begin{pmatrix} \cos N\pi\nu'' & -\sin N\pi\nu'' \\ \sin N\pi\nu'' & \cos N\pi\nu'' \end{pmatrix} (\mathbf{LB}_r)^{-1} \\ &= e^{N\pi F/2} \begin{pmatrix} \cos N\pi\nu'' + \frac{\alpha_r\gamma_r + \beta_r\delta_r}{\Delta_r} \sin N\pi\nu'' & -\frac{\alpha_r^2 + \beta_r^2}{\Delta_r} \sin N\pi\nu'' \\ \frac{\gamma_r^2 + \delta_r^2}{\Delta_r} \sin N\pi\nu'' & \cos N\pi\nu'' - \frac{\alpha_r\gamma_r + \beta_r\delta_r}{\Delta_r} \sin N\pi\nu'' \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

ここで Δ_r は \mathbf{LB}_r の行列式とした：

$$\Delta_r \equiv \alpha_r\delta_r - \beta_r\gamma_r.$$

boundary 1 : (2.2.9) 式を満たすためには

$$(\gamma_r^2 + \delta_r^2) \sin N\pi\nu'' = 0$$

であることが必要である．ここで \mathbf{LB}_r の正則性のため， γ_r と δ_r が同時に 0 となることはない．従って

$$\sin N\pi\nu'' = 0$$

である． $0 < \nu'' < 1$ なので $N = 1$ のときは上式は成り立たず， $N \geq 2$ のとき

$$\nu'' = \frac{m}{N} \quad (m = 1, 2, \dots, N-1). \quad (2.3.3)$$

またこのとき $\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)]$ は

$$\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)] = 2e^{F\pi/2} \cos \frac{m\pi}{N} \quad (m = 1, 2, \dots, N-1). \quad (2.3.4)$$

を満たすことになる．

boundary 2 : (2.2.10) 式を満たすためには

$$(\alpha_r^2 + \beta_r^2) \sin N\pi\nu'' = 0$$

であることが必要であるが，やはり α_r と β_r が同時に 0 となることはない．従って

$$\sin N\pi\nu'' = 0$$

である．この場合も $N = 1$ のときは上式は成り立たない． $N \geq 2$ のときは (2.3.3), (2.3.4) 式が成り立つ．

boundary 3 : 先ず $F \neq 0$ の場合は係数が違うため, (2.2.11) 式のようになることは有り得ない. $F = 0$ のときは

$$\sin N\pi\nu'' = 0 \text{ and } \cos N\pi\nu'' = 1$$

であるとき (2.2.11) 式を満足する. この場合は $N = 1, 2$ のときは上式は成り立たず $N \geq 3$ のとき

$$\nu'' = \frac{2m}{N} \quad (m = 1, 2, \dots, \left[\frac{N-1}{2}\right]) \quad (2.3.5)$$

である. ここで $\left[\frac{N-1}{2}\right]$ は $(N-1)/2$ を超えない最大整数を表す. このとき $\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)]$ は

$$\text{tr}[\mathbf{G}_d(\pi, 0)] = 2e^{F\pi/2} \cos \frac{2m\pi}{N} \quad (m = 1, 2, \dots, \left[\frac{N-1}{2}\right]) \quad (2.3.6)$$

を満たす.

2.3.2 $\nu' = 0$, $\nu'' = 0$ or 1

標準形が (2.2.22) ならば明らかに boundary 1, boundary 2 の境界条件を満たす. boundary 3 を満たすためには $F = 0$ であることが必要で, $\nu'' = 1$ であるならば, 更に N が偶数でなくてはならない.

以下では標準形が (2.2.23) である場合のみを考える. ここで

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (2.3.7)$$

とすると,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_d(\pi, 0)^N &= \mathbf{L} \begin{pmatrix} (e^{\pi(\nu''+F/2)})^N & N \\ 0 & (e^{\pi(\nu''+F/2)})^N \end{pmatrix} \mathbf{L}^{-1} \\ &= \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \Delta e^{N\pi(\nu''+F/2)} - Nac & Na^2 \\ -Nc^2 & \Delta e^{N\pi(\nu''+F/2)} + Nac \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

ここで Δ は \mathbf{L} の行列式とした:

$$\Delta \equiv ad - bc.$$

boundary 1 : (2.2.9) 式を満たすためには $c = 0$ が必要である. このとき \mathbf{L} の正則性のため $d = 0$ となることはない. よって $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ が

$$\mathbf{G}_d(\pi, 0) = \begin{pmatrix} e^{\pi(\nu''+F/2)} & a/d \\ 0 & e^{\pi(\nu''+F/2)} \end{pmatrix} \quad (2.3.9)$$

という形であれば (2.2.9) 式を満足する.

boundary 2 : (2.2.10) 式を満たすためには $a = 0$ が必要である. このとき \mathbf{L} の正則性のため $b = 0$ となることはない. よって $\mathbf{G}_d(\pi, 0)$ が

$$\mathbf{G}_d(\pi, 0) = \begin{pmatrix} e^{\pi(\nu''+F/2)} & 0 \\ c/b & e^{\pi(\nu''+F/2)} \end{pmatrix} \quad (2.3.10)$$

という形であれば (2.2.10) 式を満足する.

boundary 3 : (2.2.11) 式を満たすためには a と c が同時に 0 となる必要があるが, これは \mathbf{L} の正則性と矛盾する. よってこの場合周期性境界条件を満足することは無い.

2.3.3 $\nu' \neq 0$, $\nu'' = 0$ or 1

明らかに行列 LB_i の成分は実数である．それをいま

$$LB_i = \begin{pmatrix} \alpha_i & \beta_i \\ \gamma_i & \delta_i \end{pmatrix} \quad (2.3.11)$$

とすると,

$$\begin{aligned} G_d(\pi, 0)^N &= e^{N\pi(i\nu''+F/2)} LB_i \begin{pmatrix} \cosh N\pi\nu' & \sinh N\pi\nu' \\ \sinh N\pi\nu' & \cosh N\pi\nu' \end{pmatrix} (LB_i)^{-1} \\ &= e^{N\pi(i\nu''+F/2)} \begin{pmatrix} \cosh N\pi\nu' - \frac{\alpha_i\gamma_i - \beta_i\delta_i}{\Delta_i} \sinh N\pi\nu' & \frac{\alpha_i^2 - \beta_i^2}{\Delta_i} \sinh N\pi\nu' \\ -\frac{\gamma_i^2 - \delta_i^2}{\Delta_i} \sinh N\pi\nu' & \cosh N\pi\nu' + \frac{\alpha_i\gamma_i - \beta_i\delta_i}{\Delta_i} \sinh N\pi\nu' \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

ここで Δ_i は LB_i の行列式とした：

$$\Delta_i \equiv \alpha_i\delta_i - \beta_i\gamma_i.$$

boundary 1 : (2.2.9) 式を満たすためには

$$(\gamma_i^2 - \delta_i^2) \sinh N\pi\nu' = 0$$

でなければならない．今 $\nu' \neq 0$ なので

$$\gamma_i = \pm\delta_i$$

である．よって $G_d(\pi, 0)$ が

$$G_d(\pi, 0) = e^{\pi(i\nu''+F/2)} \begin{pmatrix} e^{\mp\pi\nu'} & \frac{\alpha_i \pm \beta_i}{\delta_i} \sinh \pi\nu' \\ 0 & e^{\pm\pi\nu'} \end{pmatrix} \quad (\text{複合同順}) \quad (2.3.13)$$

という形であれば (2.2.9) 式を満足する．

boundary 2 : (2.2.10) 式を満たすためには

$$(\alpha_i^2 - \beta_i^2) \sinh N\pi\nu' = 0$$

であることが必要であるが，上と同様な理由で

$$\alpha_i = \pm\beta_i$$

である．よって $G_d(\pi, 0)$ が

$$G_d(\pi, 0) = e^{\pi(i\nu''+F/2)} \begin{pmatrix} e^{\pm\pi\nu'} & 0 \\ \frac{\gamma_i \pm \delta_i}{\beta_i} \sinh \pi\nu' & e^{\mp\pi\nu'} \end{pmatrix} \quad (\text{複合同順}) \quad (2.3.14)$$

という形であれば (2.2.10) 式を満足する．

boundary 3 : $\nu' \neq 0$ なので

$$\alpha_i^2 = \beta_i^2 \quad \text{and} \quad \gamma_i^2 = \delta_i^2 \quad (2.3.15)$$

であることが必要. これらの中で LB_i の正則性が保証されるのは $\alpha_i = \pm\beta_i$, $\gamma_i = \mp\delta_i$ の場合で, このとき

$$G_d(\pi, 0)^N = e^{N\pi(i\nu'' + F/2)} \begin{pmatrix} e^{\pm N\pi\nu'} & 0 \\ 0 & e^{\mp N\pi\nu'} \end{pmatrix} \quad (\text{以上複合同順}). \quad (2.3.16)$$

従って (2.2.11) 式のようになることは有り得ないので周期性境界条件は満たさない.

2.4 $\rho(x, t)$ の挙動

ここから boundary 1, 2 に限定し, 更に具体的に $U(x) = q \cos 2x$ として (2.1.1) の時間依存解 $\rho(x, t)$ の計算に入る. これら境界条件を満足する (2.1.9) 式の解が得られるのはある特別な k に限られる. これ以後それら変数分離定数と解の添え字に番号を付けて区別する. このとき $\psi_n(x)$ は以下の規格直交性をなす:

$$\int_0^{N\pi} dx W(x) \psi_n(x) \psi_m(x) = \delta_{n,m}. \quad (2.4.1)$$

ここで $\delta_{n,m}$ は Kronecker-Delta 記号である. また一般に k_n は

$$k_n = \int_0^{N\pi} dx W(x) \{\psi'_n(x)\}^2 \geq 0 \quad (2.4.2)$$

である [21]. 等号は boundary 1 のとき成り立ち, そのときを $n = 0$ と定める. 明らかに $\psi_0(x) = 1$ である.

確率密度関数は境界条件を満たす解 $W(x)e^{-k_nt}\psi_n(x)$ の線形結合で表され,

$$\rho(x, t) = W(x) \sum_n c_n e^{-k_nt} \psi_n(x) \quad (2.4.3)$$

となる. ここで c_n は初期条件 (2.1.2) より決まり

$$\rho(x, t) = W(x) \sum_n e^{-k_nt} \psi_n(x_0) \psi_n(x). \quad (2.4.4)$$

となる.

2.4.1 $F = 0$

先ず $F = 0$ のとき, q , k_n を変えて特性指数の値がどのように変化するかを表したのが Figure 2.4.1 である. 白色の領域で $\nu' = 0$, $0 < \nu'' < 1$, 灰色の領域で $\nu' \neq 0$, $\nu'' = 1$ を満足する. 曲線はそれぞれ, r_1, r_2, \dots が (2.3.9) 式, a_1, a_2, \dots が (2.3.10) を満たし, また $n \geq 1$ に対して, a_{2n} と r_{2n} で $\nu'' = 0$, a_{2n-1} と r_{2n-1} で $\nu'' = 1$ である.

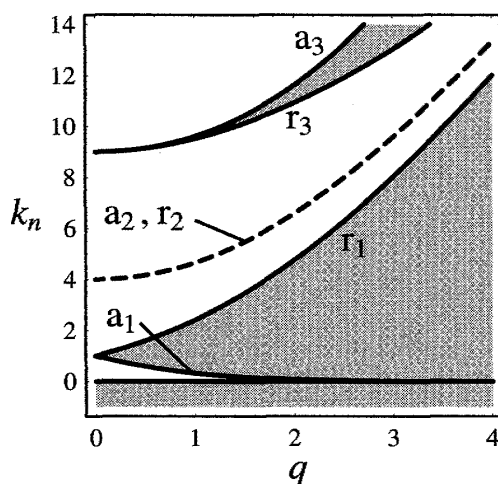


Figure 2.4.1: $V(x) = q \cos 2x$. 白色領域; $\nu' = 0$, $0 < \nu'' < 1$, 灰色領域; $\nu' \neq 0$, $\nu'' = 1$.

a_2 , r_2 は共通している. 従ってこの曲線上では

$$L^{-1}G_d(\pi, 0)L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.4.5)$$

となっており, boundary 3 を満足する.

2.3 より, 白色領域内部の

$$\nu'' = \frac{m}{N} \quad (m = 1, \dots, N-1)$$

によって境界条件は満たされる. この ν'' は k_n , q によって決まるので, 上式は Figure 2.4.1 に於いて曲線を描く. 例として $N = 5$ のときの一番下の白色領域を拡大したのが Figure 2.5.1 である. 実線が $\nu'' = m/N$ を意味している. この例だと白色領域内部には 4 本の曲線が存在するが, 一般には $N - 1$ 本存在することとなる.

この場合, 灰色の領域に於いて (2.3.13), (2.3.14) を満足するパラメータは存在しなかった. よって一番下の白い領域に存在する k_n から次の白い領域の k_n までは灰色領域分のギャップが存在し, あたかも固体物理で出てくるバンド構造の様に, 境界条件を満たす解として許される領域とそうでない領域が混在している. このギャップは q が大きくなる程大きくなるので, それにつれて一番下の白色領域の k_n は小さくなるが, 逆にその次の白色領域の k_n の値は大きくなる. k_n が大きければ小さい時間でも $e^{-k_n t}$ が十分小さくなるので, $\rho(x, t)$ に対するそれらの寄与は無視できる. つまり $\rho(x, t)$ の挙動はこの一番下の白い領域に存在する有限個の k_n によって再現できるはずである.

そこで実際に (2.4.4) 式を使って, 有限個の k_n で $\rho(x, t)$ を作ってみる. x の領域は

$$0 \leq x \leq 5\pi$$

とし (つまり $N = 5$), また $q = 3$, $x_0 = 7$ とする. このとき前述の通り, 一番下の白色領域内には 4 つの k_n が存在する. これらに boundary 1 では $k_0 = 0$ が, boundary 2 では境界線 a_1 が加わり, 都合 5 つ存在することになる. それらの k_n で, 境界条件を満足するような (2.1.9) 式の数値解

$\psi_n(x)$ で構成した $\rho(x, t)$ の時間発展を Figure 2.4.2(boundary 1), Figure 2.4.3(boundary 2) に記した. "◇" は拡散方程式 (2.1.1) の数値解を表すが, 完全に一致している.

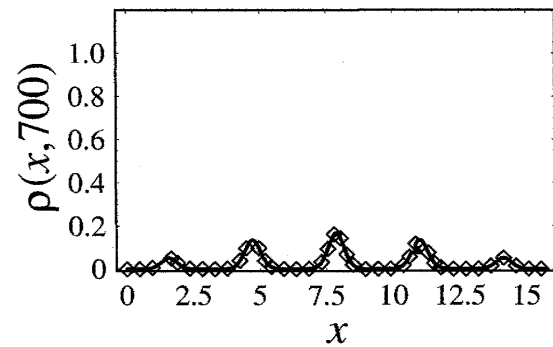
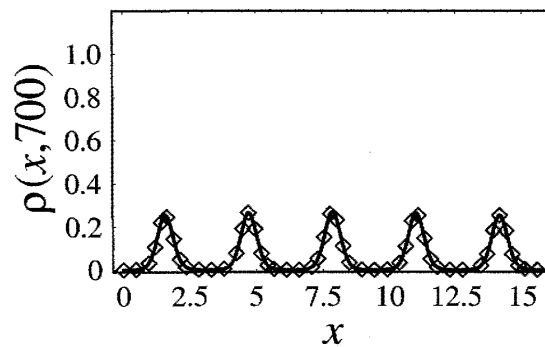
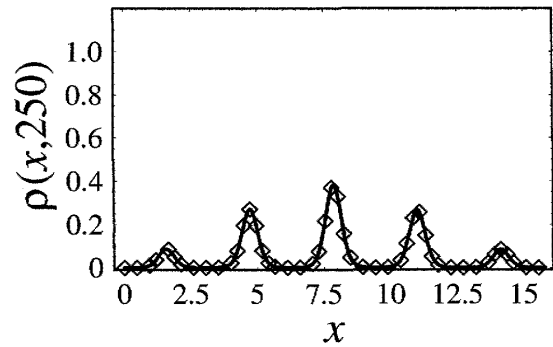
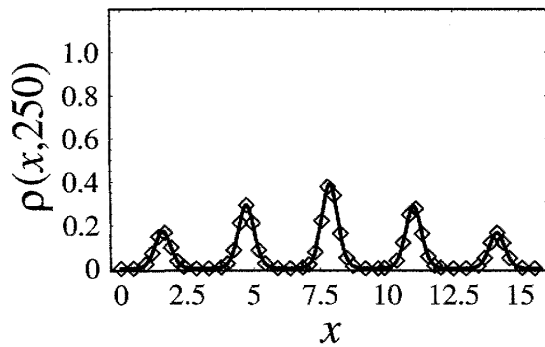
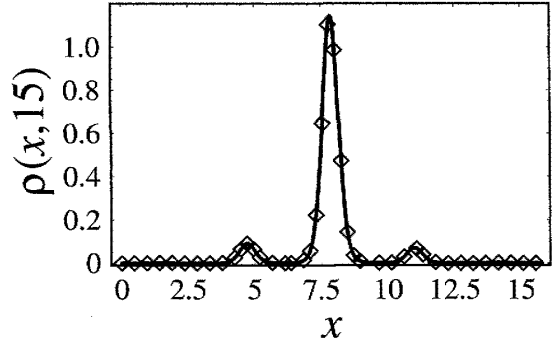
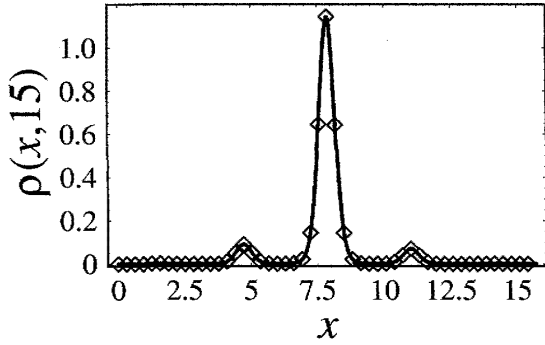


Figure 2.4.2: $F = 0$, $q = 3$, $x_0 = 7$, boundary 1(両端が反射壁) での $\rho(x, t)$ の時間発展. 実線; (2.4.4) 式に於いて和を $n = 0$ から 4 までとったもの. ◇; (2.1.1) 式の数値解.

Figure 2.4.3: $F = 0$, $q = 3$, $x_0 = 7$, boundary 2(両端が吸収壁) での $\rho(x, t)$ の時間発展. 実線; (2.4.4) 式に於いて和を $n = 1$ から 5 までとったもの. ◇; (2.1.1) 式の数値解.

2.4.2 $F \neq 0$

続いて $F \neq 0$ の例として $F = 1$ としたときの特性指数の変化を Figure 2.4.4 に示した。白色の領域で $\nu' = 0$, $0 < \nu'' < 1$ を満足する。灰色の領域では $\nu' \neq 0$ であり, 更に a_2, r_2 を含む領域で $\nu'' = 0$, それ以外の領域では $\nu'' = 1$ を満足する。灰色の領域内部にある実線はそれぞれ, r_1, r_2, \dots が (2.3.13) 式, a_1, a_2, \dots が (2.3.14) を満たす曲線である。この場合白色と灰色の領域の境界では (2.3.9), (2.3.10) 式は成り立たない。

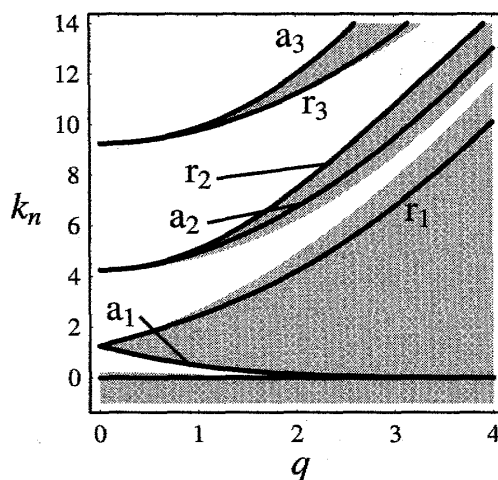


Figure 2.4.4: $V(x) = x + q \cos 2x$. 白色領域; $\nu' = 0$, $0 < \nu'' < 1$, 灰色領域; $\nu' \neq 0$, $\nu'' = 0$ or 1.

$F = 1$ でも一番下の白い領域から次の白い領域までギャップが存在し, ギャップの幅は q が大きくなる程大きくなる。従って q が大きい場合は $F = 0$ のときと同様, $\rho(x, t)$ の挙動は一番下の白い領域に存在する有限個の k_n によって再現できるはずである。

ここで $q = 3$, $x_0 = 15$ として, 有限個の k_n で $\rho(x, t)$ を作ってみる。 x の領域は $F = 0$ の場合と同じにした。この場合でも一番下の白い領域には4つの k_n が存在し, 更に boundary 1 では $k_0 = 0$, boundary 2 では境界線 a_1 が加わる (Figure 2.5.2 参照)。それら k_n で, 境界条件を満足するような (2.1.9) 式の数値解で構成した $\rho(x, t)$ の時間発展を Figure 2.4.5(boundary 1), Figure 2.4.6(boundary 2) に記した。 ”◇” は拡散方程式 (2.1.1) の数値解を一緒に載せているが, こちらも完全に一致しているのがわかる。

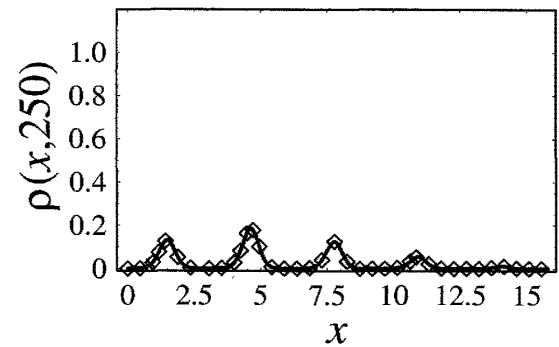
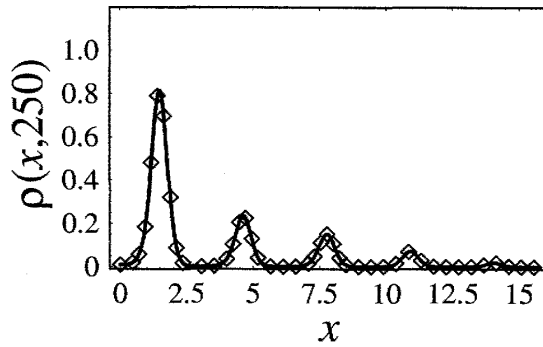
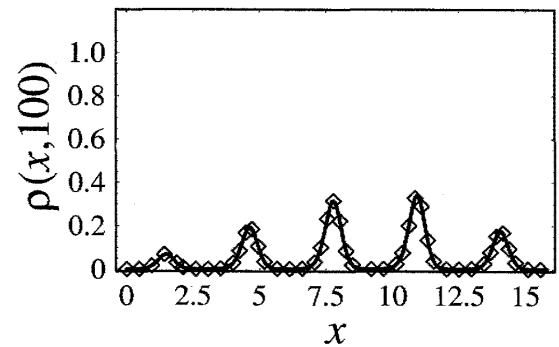
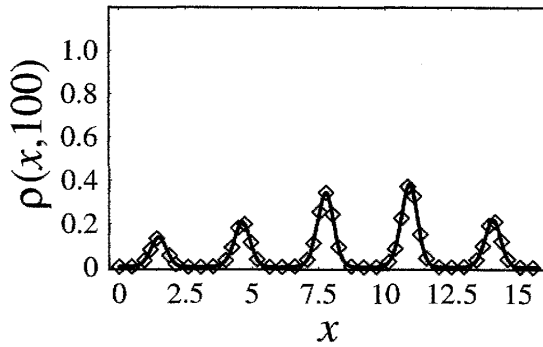
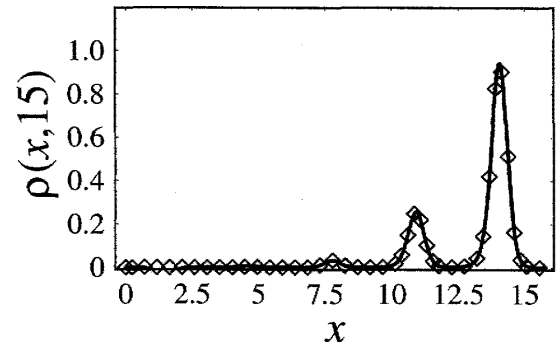
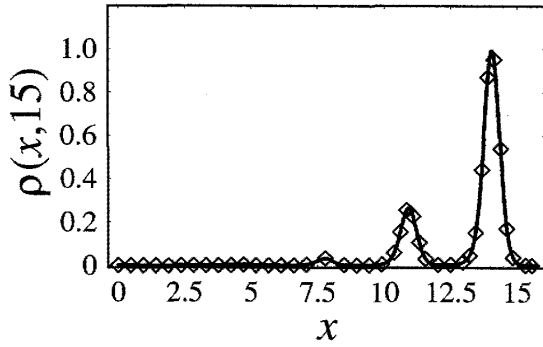


Figure 2.4.5: $F = 1$, $q = 3$, $x_0 = 15$, boundary 1(両端が反射壁)での $\rho(x, t)$ の時間発展. 実線; (2.4.4) 式に於いて和を $n = 0$ から 4 までとったもの. \diamond ; (2.1.1) 式の数値解.

Figure 2.4.6: $F = 1$, $q = 3$, $x_0 = 15$, boundary 2(両端が吸収壁)での $\rho(x, t)$ の時間発展. 実線; (2.4.4) 式に於いて和を $n = 1$ から 5 までとったもの. \diamond ; (2.1.1) 式の数値解.

2.5 k_n の漸近的表現

Figure 2.4.1, 2.4.4 共に, 一番下の白い領域では q が大きくなるにつれて k_n の値が減少していくのがわかる. そこで q が非常に大きいとして, k_n が小さいところでの (2.3.4) の関係式を求めてみることにする.

$\Psi_n(x)$ を k_n で展開する.

$$\Psi_n(x) = \Psi_n^{(0)}(x) + k_n \Psi_n^{(1)}(x) + \cdots \quad (2.5.1)$$

ここで $\Psi_n(x)$ の初期条件は $\Psi_n^{(0)}(x)$ にのみ課す:

$$\Psi_n^{(j)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (j \geq 1).$$

初期条件が

$$\text{initial condition I: } \psi_n(0) = 1, \quad \psi'_n(0) = 0 \quad (2.5.2)$$

$$\text{initial condition II: } \psi_n(0) = 0, \quad \psi'_n(0) = 1 \quad (2.5.3)$$

であるものに対してそれぞれの解は以下ようになる.

$$\text{initial condition I: } \Psi_n(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - k_n \begin{pmatrix} \int_0^x dx_1 e^{V(x_1)} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-V(x_2)} \\ e^{V(x)} \int_0^x dx_1 e^{-V(x_1)} \end{pmatrix} + O(k_n^2) \quad (2.5.4)$$

$$\begin{aligned} \text{initial condition II: } \Psi_n(x) = & \begin{pmatrix} e^{-V(0)} \int_0^x dx_1 e^{V(x_1)} \\ e^{-V(0)+V(x)} \end{pmatrix} \\ & - k_n \begin{pmatrix} e^{-V(0)} \int_0^x dx_1 e^{V(x_1)} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-V(x_2)} \int_0^{x_2} dx_3 e^{V(x_3)} \\ e^{-V(0)+V(x)} \int_0^x dx_1 e^{-V(x_1)} \int_0^{x_1} dx_2 e^{V(x_2)} \end{pmatrix} + O(k_n^2) \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

性質 iii) を考慮すると, $G_d(x, 0)$ の成分は初期条件が[§] (2.5.3) 式である解より構成されているので,

$$\text{tr}[G_d(\pi, 0)] = 1 + e^{F\pi} - k_n \tau + O(k_n^2). \quad (2.5.6)$$

となる. ここで

$$\tau = \int_0^\pi dx_1 e^{V(x_1)} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-V(x_2)} + e^{F\pi} \int_0^\pi dx_1 e^{-V(x_1)} \int_0^{x_1} dx_2 e^{V(x_2)} \quad (2.5.7)$$

とした. $U(x) = q \cos 2x$ の場合は

$$\tau = \pi \frac{e^{F\pi} - 1}{F} \left(I_0(q)^2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l F^2 I_l(q)^2}{F^2 + 4l^2} \right) \quad (2.5.8)$$

となる[§]. 特に $F = 0$ では $\tau = \pi^2 I_0(q)^2$ である.

[§]付録 A 参照.

よって k_n の 1 次までとすることで, (2.3.4) の関係式から k_n が求まる. 先ず $F = 0$ のときは

$$k_n = \frac{4 \sin^2 \frac{n\pi}{2N}}{\pi^2 I_0(q)^2} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1) \quad (2.5.9)$$

となる. 上式に於いて $n = 0$ とすると, $k_0 = 0$ が得られる. また $n = N$ とすると $k_N = 4/\pi^2 I_0(q)^2$ であり, これと (2.5.6) 式から, $\text{tr}[G_d(\pi, 0)] = -2 + O(k_n^2)$ となる. これは (2.5.9) 式が a_1 を k_n が小さいところで漸近的に再現することを意味する. よって

$$k_n = \frac{4 \sin^2 \frac{n\pi}{2N}}{\pi^2 I_0(q)^2} \quad \begin{cases} \text{boundary 1 : } n = 0, 1, \dots, N-1 \\ \text{boundary 2 : } n = 1, 2, \dots, N \end{cases} \quad (2.5.10)$$

と拡張できる. Figure 2.5.1 に $\nu'' = n/5$ ($\text{tr}[G_d(\pi, 0)] = 2 \cos \frac{n\pi}{5}$), 境界線 a_1 (実線), 並びに固有値の漸近解 (2.5.10) (破線) を一緒に載せた.

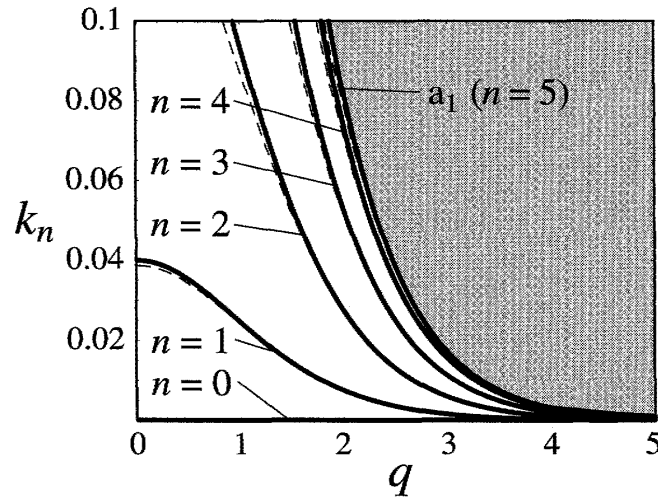


Figure 2.5.1: (2.1.9) 式の固有値; $F = 0$, $N = 5$. 実線: $\nu'' = n/5$ ($\text{tr}[G_d(\pi, 0)] = 2 \cos \frac{n\pi}{5}$), 境界線 a_1 , 破線: 固有値の漸近解 (2.5.10).

同様に $F \neq 0$ の場合は

$$k_n = \frac{1 + e^{F\pi} - 2e^{F\pi/2} \cos \frac{n\pi}{N}}{\tau} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1) \quad (2.5.11)$$

となる. このときは $k_0 = 0$ や a_1 を表すことは出来ない. Figure 2.5.2 に $F = 1$ の場合について $\nu'' = n/5$ ($\text{tr}[G_d(\pi, 0)] = 2e^{\pi/2} \cos \frac{n\pi}{5}$), a_1 (実線), 並びに固有値の漸近解 (2.5.11) (破線) を一緒に載せた.

2.6 Kramers の理論との比較

このように k_n の漸近解が解析的に得られた. 特に一番小さい k_1 の逆数は平衡に達する時間の目安となる. 例えば Figure 2.6.1 のように $F > 0$ で $N = 2$ の場合を考える.

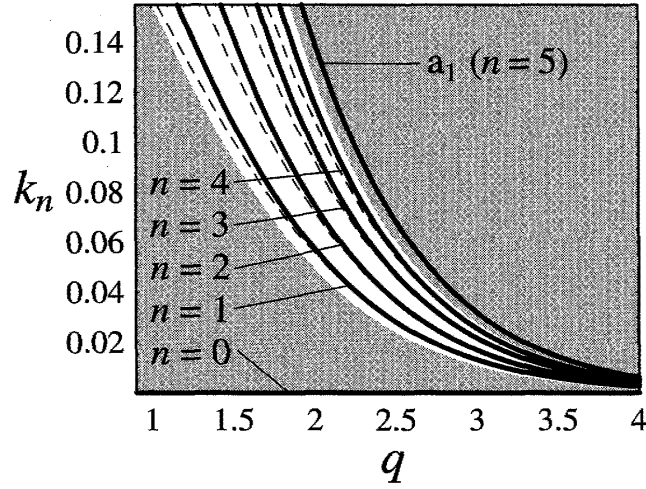


Figure 2.5.2: (2.1.9) 式の固有値； $F = 1$, $N = 5$. 実線： $\nu'' = n/5$ ($\text{tr}[G_d(\pi, 0)] = 2e^{\pi/2} \cos \frac{n\pi}{5}$), 境界線 a_1 , 破線：固有値の漸近解 (2.5.11).

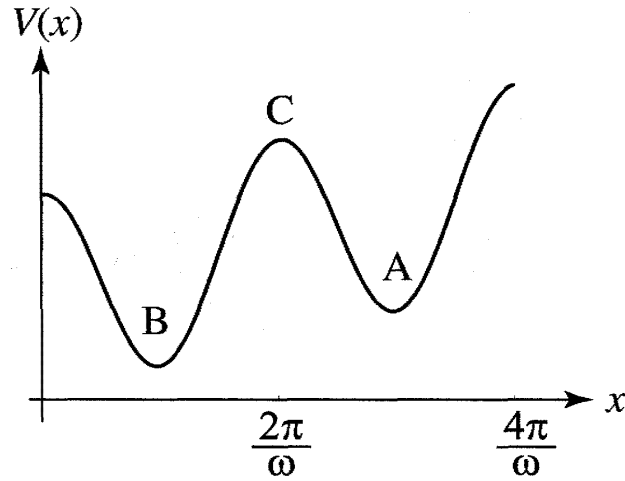


Figure 2.6.1: $N = 2$, $F > 0$ の場合の洗濯板ポテンシャル

ここで Kramers の理論と比較するため、若干ポテンシャルを変更し以下のようにする。

$$U(x) = q \cos \omega x$$

この周期は $2\pi/\omega$ なので、領域は $0 \leq x \leq \frac{4\pi}{\omega}$ となる。また極小、極大を存在させるために

$$F < \omega q \quad (2.6.1)$$

とする。

この場合 τ は

$$\tau = \int_0^{2\pi/\omega} dx_1 e^{Fx_1 + q \cos \omega x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-(Fx_2 + q \cos \omega x_2)}$$

$$+ e^{2F\pi/\omega} \int_0^{2\pi/\omega} dx_1 e^{-(Fx_1+q \cos \omega x_1)} \int_0^{x_1} dx_2 e^{Fx_2+q \cos \omega x_2} \quad (2.6.2)$$

であるが

$$x_i \longrightarrow \frac{2x_i}{\omega} \quad (i = 1, 2)$$

と変換すれば先の結果が使えて

$$\begin{aligned} \tau &= \left(\frac{2}{\omega}\right)^2 \left\{ \int_0^\pi dx_1 e^{(2F/\omega)x_1+q \cos 2x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-\{(2F/\omega)x_2+q \cos 2x_2\}} \right. \\ &\quad \left. + e^{2F\pi/\omega} \int_0^\pi dx_1 e^{-\{(2F/\omega)x_1+q \cos 2x_1\}} \int_0^{x_1} dx_2 e^{(2F/\omega)x_2+q \cos 2x_2} \right\} \\ &= \frac{2\pi}{\omega} \frac{e^{2F\pi/\omega} - 1}{F} \left(I_0(q)^2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l (2F/\omega)^2 I_l(q)^2}{(2F/\omega)^2 + 4l^2} \right). \end{aligned} \quad (2.6.3)$$

よって

$$\frac{1}{k_1} = \frac{\tau}{e^{2F\pi/\omega} + 1} = \frac{2\pi \tanh F\pi/\omega}{\omega F} \left(I_0(q)^2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l (2F/\omega)^2 I_l(q)^2}{(2F/\omega)^2 + 4l^2} \right) \quad (2.6.4)$$

となる．ここで q が非常に大きいとすると

$$I_l(q) \simeq \frac{e^q}{\sqrt{2\pi q}} \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.6.5)$$

と近似されるので

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_1} &\simeq \frac{2\pi \tanh F\pi/\omega}{\omega F} \left(1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l (2F/\omega)^2}{(2F/\omega)^2 + 4l^2} \right) \frac{e^{2q}}{2\pi q} \\ &= \frac{\pi e^{2q}}{q\omega^2 \cosh F\pi/\omega} \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

となる．更に (2.6.1) 式を守りつつ F が十分大きいとすると、

$$\frac{1}{k_1} \simeq \frac{2\pi e^{-(F\pi/\omega)+2q}}{q\omega^2} \quad (2.6.7)$$

となる．

一方 Kramers の理論を使って、Figure 2.6.1 の A からポテンシャル障壁 C を越えて B まで到達する平均時間 τ_{AB} を求める [22, 23]．これは系が平衡に達するまでの時間と考えてよい． F 、 q が非常に大きいとき、A、B、C、各々のポテンシャルの値はおよそ

$$V_A \simeq \frac{3}{\omega} F\pi - q, \quad V_B \simeq \frac{1}{\omega} F\pi - q, \quad V_C \simeq \frac{2}{\omega} F\pi + q, \quad (2.6.8)$$

なので、A から測った C の高さはおよそ

$$V_C - V_A \simeq -\frac{F\pi}{\omega} + 2q \quad (2.6.9)$$

となる．またこのとき $V(x)$ は A, C の近傍で

$$V(x) \simeq V_A + \frac{1}{2}\omega^2 q \left(x - \frac{3\pi}{\omega}\right)^2$$

$$V(x) \simeq V_C - \frac{1}{2}\omega^2 q \left(x - \frac{2\pi}{\omega}\right)^2$$

と展開できる．従って

$$\tau_{AB} \simeq \frac{2\pi e^{-(F\pi/\omega)+2q}}{q\omega^2} \quad (2.6.10)$$

であり，Kramers の理論と完全に一致することがわかる．

3 まとめ

本論文では，洗濯板ポテンシャル (1.1.1) の影響下にある Smoluchowski 方程式に関して，境界条件を，両端が反射壁，両端が吸収壁とし，有限領域での時間依存解について調べた．得られた結果を下に箇条書きでまとめる．

- Smoluchowski 方程式の解を変数分離することで，空間部分は (2.1.9) のような Sturm-Liouville 型の方程式へと帰着できた．この方程式は $\psi(x)$ の 1 階微分の係数が周期関数となっているが，パラメトリック振動子に於ける安定性の議論を応用することで，特性指数 ν を使って上記の境界条件が整然と分類された．
- 上記境界条件の下で変数分離定数 k は離散化されるが，これら分離定数は特性指数が $\nu' = 0$, $0 < \nu'' < 1$ である領域 (Figure 2.4.1, 2.4.4 の白色領域) に集中して存在することがわかった．一番下にある白色領域は，ポテンシャルの窪みの深さ q が増加するにつれ k の幅が減少し，1 つ上の白色領域との間隔が広がっていく．従って確率密度関数 $\rho(x, t)$ の時間発展の挙動が有限個の k で再現でき，更にそれら k の漸近的な解も解析的に得ることが出来た．
- 一番小さい k の漸近的解から求めた系が平衡に達するまでの時間が，Kramers の理論から得られるものと完全に一致した．

特に最後の結果のように，2 安定状態での拡散過程に対して Kramers が仮定した条件を知らなくとも，全く異なる方法で同じ結果が導出されるということは大変興味深い．

最後に今後の課題について触れる．今回の研究では有限領域の区間は π の整数倍とした．当然この制限は取り払われるべきで，任意の区間での拡散過程が議論されなくてはならない．現段階で数値的に確認されているのは，区間を $0 \leq x \leq L$ ($N\pi < L < (N+1)\pi$) とした場合， $\nu' = 0$, $0 < \nu'' < 1$ の領域には $N-1$ 個の k が存在するということである．つまり任意の区間であっても q が大きければ， $\rho(x, t)$ の挙動が有限個の k で再現出来そうである．

付録 A : τ の計算

公式

$$e^{\pm q \cos 2x} = I_0(q) + 2 \sum_{l=1}^{\infty} (\pm 1)^l I_l(q) \cos 2lx \quad (\text{A.1})$$

を利用する.

$$\begin{aligned} & \int_0^{\pi} dx_1 e^{-Fx_1 - q \cos 2x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{Fx_2 + q \cos 2x_2} \\ &= I_0(q)^2 \iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \\ &+ 2I_0(q) \left\{ \sum_{l_1} (-1)^{l_1} I_{l_1}(q) \iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \cos 2l_1 x_1 \right. \\ &+ \sum_{l_2} I_{l_2}(q) \iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \cos 2l_2 x_2 \left. \right\} \\ &+ 4 \sum_{l_1, l_2} (-1)^{l_1} I_{l_1}(q) I_{l_2}(q) \iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \cos 2l_1 x_1 \cos 2l_2 x_2 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

ただし

$$\iint dx_1 dx_2 \equiv \int_0^{\pi} dx_1 \int_0^{x_1} dx_2, \quad \sum_l \equiv \sum_{l=1}^{\infty} \quad (\text{A.3})$$

とした. このとき

$$\iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} = \frac{F\pi + e^{-F\pi} - 1}{F^2} \quad (\text{A.4})$$

$$\iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \cos 2l_1 x_1 = \frac{e^{-F\pi} - 1}{F^2 + 4l_1^2} \quad (\text{A.5})$$

$$\iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \cos 2l_2 x_2 = \frac{e^{-F\pi} - 1}{F^2 + 4l_2^2} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} & \iint dx_1 dx_2 e^{-Fx_1 + Fx_2} \cos 2l_1 x_1 \cos 2l_2 x_2 \\ &= \begin{cases} \frac{F^2(e^{-F\pi} - 1)}{(F^2 + 4l_1^2)(F^2 + 4l_2^2)} & (l_1 \neq l_2) \\ \frac{F^2(e^{-F\pi} - 1)}{(F^2 + 4l_1^2)^2} + \frac{F\pi}{2(F^2 + 4l_1^2)} & (l_1 = l_2) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

であるから,

$$\begin{aligned} & \int_0^{\pi} dx_1 e^{-Fx_1 - q \cos 2x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{Fx_2 + q \cos 2x_2} \\ &= \frac{F\pi + e^{-F\pi} - 1}{F^2 I_0(q)^2} + 2I_0(q) \sum_l \frac{\{1 + (-1)^l\} (e^{-F\pi} - 1)}{F^2 + 4l^2} I_l(q) \\ &+ 4 \sum_{l_1, l_2} \frac{(-1)^{l_1} F^2 (e^{-F\pi} - 1)}{(F^2 + 4l_1^2)(F^2 + 4l_2^2)} I_{l_1}(q) I_{l_2}(q) + 2 \sum_l \frac{(-1)^l F\pi I_l(q)^2}{F^2 + 4l^2} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

となる．また上式に於いて $F \rightarrow -F$, $q \rightarrow -q$ とし, $I_l(-q) = (-1)^l I_l(q)$ を使えば

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\pi dx_1 e^{Fx_1+q \cos 2x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-Fx_2-q \cos 2x_2} \\
 &= \frac{-F\pi + e^{F\pi} - 1}{F^2 I_0(q)^2} + 2I_0(q) \sum_l \frac{\{1 + (-1)^l\} (e^{F\pi} - 1)}{F^2 + 4l^2} I_l(q) \\
 &+ 4 \sum_{l_1, l_2} \frac{(-1)^{l_2} F^2 (e^{F\pi} - 1)}{(F^2 + 4l_1^2)(F^2 + 4l_2^2)} I_{l_1}(q) I_{l_2}(q) - 2 \sum_l \frac{(-1)^l F\pi I_l(q)^2}{F^2 + 4l^2}
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

となるので, 結局

$$\begin{aligned}
 \tau &= \int_0^\pi dx_1 e^{Fx_1+q \cos 2x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{-Fx_2-q \cos 2x_2} \\
 &+ e^{F\pi} \int_0^\pi dx_1 e^{-Fx_1-q \cos 2x_1} \int_0^{x_1} dx_2 e^{Fx_2+q \cos 2x_2} \\
 &= \pi \frac{e^{F\pi} - 1}{F} \left(I_0(q)^2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l F^2 I_l(q)^2}{F^2 + 4l^2} \right)
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

となる．

参考文献

- [1] Risken H 1989 *The Fokker-Planck Equation*, 2nd ed. (Berlin: Springer-Verlag).
- [2] Fulde P, Pietronero L, Schneider W R and Strässler S 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 1776.
- [3] Dieterich W 1977 *Z. Physik B* **27** 177.
- [4] Schneider T 1978 *Phys. Rev. B* **18** 1417.
- [5] Ivanchenko Ym and Zil'berman L A 1969 *Sov. Phys. JETP* **28** 1272.
- [6] Ambegaokar V 1969 *Phys. Rev. Lett.* **22** 1364.
- [7] Kurkijarvi J 1970 *Phys. Lett. A* **31** 314.
- [8] Lee Pa 1971 *J. Appl. Phys.* **42** 325.
- [9] Berdichevsky V and Gitterman M 1997 *Phys. Rev. E* **56** 6340.
- [10] Coffey W T, Dejjardin J L, Kalmykov Y P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 3480.
- [11] Cresser Jd, Louisell Wh, Meystre P, Schleich W and Scully Mo 1982 *Phys. Rev. A* **25** 2214.
- [12] Cresser Jd, Hammonds D, Louisell Wh, Meystre P and Risken H 1982 *Phys. Rev. A* **25** 2226.
- [13] Schleich W, Cha C -S and Cresser J D 1984 *Phys. Rev. A* **29** 230.
- [14] Chow W W, Gea-Banacloche J, Pedrotti L M, Sanders V, Schleich W and Scully M O 1985 *Rev. Mod. Phys.* **57** 61.
- [15] Wiesenfeld K et. al. 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 2125.
- [16] Kurrer Ch and Schulten K 1995 *Phys. Rev. E* **51** 6213.
- [17] Stratonovich R L 1958 *Radiotekhnika; elektronika* **3** 497.
- [18] Mörsch M, Risken H and Vollmer H D 1978 *Z. Physik. B* **32** 245.
- [19] Vollmer H D and Risken H 1978 *Z. Physik. B* **34** 313.
- [20] Vollmer H D and Risken H 1982 *Physica A* **110** 106.
- [21] Wong E 1964 *Amer. Math. Soc., Proc. of the XVth Symp. of App. Math.* 264.
- [22] Kramers H A 1940 *Physica* **7** 284.
- [23] Paul W and Baschnagel J 1999 *Stochastic Processes from Physics to Finance* (Berlin: Springer-Verlag).